

Министерство науки и высшего образования РФ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Б1.В.ДВ.07.01.04 ПРОФЕССИОНАЛЬНАЯ
ТРАЕКТОРИЯ № 1 "БИОФИЗИКА"
Молекулярное моделирование

наименование дисциплины (модуля) в соответствии с учебным планом

Направление подготовки / специальность

06.03.01 БИОЛОГИЯ

Направленность (профиль)

06.03.01 БИОЛОГИЯ

Форма обучения

очная

Год набора

2020

Красноярск 2023

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Программу составили _____

канд.биол.наук, доцент, Суковатая И.Е.

должность, инициалы, фамилия

1 Цели и задачи изучения дисциплины

1.1 Цель преподавания дисциплины

Целью изучения дисциплины «Молекулярное моделирование» является расширение и углубление знаний в области молекулярной биофизики, формирование представлений о структурно-динамической организации белковых макромолекул, физических аспектах ферментативного катализа, биофизике нуклеиновых кислот, а также об основных методах молекулярной биофизики.

1.2 Задачи изучения дисциплины

По окончании изучения дисциплины «Молекулярное моделирование» бакалавр должен

знать: основы молекулярной биофизики и основных методов молекулярной биофизики;

уметь: применение полученных знаний и навыков в области молекулярной биофизики в решении профессиональных задач

владеть: основными методами молекулярной биофизики

1.3 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Запланированные результаты обучения по дисциплине
	ОПК-11: способностью применять современные представления об основах биотехнологических и биомедицинских производств, генной инженерии, нанобиотехнологии, молекулярного моделирования
	ОПК-5: способностью применять знание принципов клеточной организации биологических объектов, биофизических и биохимических основ, мембранных процессов и молекулярных механизмов жизнедеятельности
	ПК-8: способностью использовать основные технические средства поиска научно-биологической информации, универсальные пакеты прикладных компьютерных программ, создавать базы экспериментальных биологических данных, работать с биологической информацией в глобальных компьютерных сетях

1.4 Особенности реализации дисциплины

Язык реализации дисциплины: Русский.

Дисциплина (модуль) реализуется с применением ЭО и ДОТ

URL-адрес и название электронного обучающего курса: <https://e.sfu-kras.ru/course/view.php?id=13052>.

2. Объем дисциплины (модуля)

Вид учебной работы	Всего, зачетных единиц (акад.час)	е
		1
Контактная работа с преподавателем:	0,78 (28)	
занятия лекционного типа	0,39 (14)	
практические занятия	0,39 (14)	
Самостоятельная работа обучающихся:	1,22 (44)	
курсовое проектирование (КП)	Нет	
курсовая работа (КР)	Нет	
Промежуточная аттестация (Экзамен)	1 (36)	

3 Содержание дисциплины (модуля)

3.1 Разделы дисциплины и виды занятий (тематический план занятий)

		Контактная работа, ак. час.							
№ п/п	Модули, темы (разделы) дисциплины	Занятия лекционного типа		Занятия семинарского типа				Самостоятельная работа, ак. час.	
				Семинары и/или Практические занятия		Лабораторные работы и/или Практикумы			
		Всего	В том числе в ЭИОС	Всего	В том числе в ЭИОС	Всего	В том числе в ЭИОС	Всего	В том числе в ЭИОС
1. Конформация биологических макромолекул									
	1. Тема 1.1. Структура белков, нуклеиновых кислот и других биологических полимеров. Физические и химические свойства белков, нуклеиновых кислот и других биологических полимеров. Тема 1.2.. Конформационный анализ и силы, которые определяют структуру биомacroмолекул. Тема 1.3. Физические основы конформационной стабильности биомacroмолекул в различных условиях	3							

<p>2. Тема 1.1. Введение в моделирование структуры белков, нуклеиновых кислот Тема 1.2. Принципы организации структуры белков. Работа в белковом банке данных “Protein Data Bank” - http://www.wwpdb.org/. Геномные и нуклеотидные базы данных GenBank - - http://www.ncbi.nlm.nih.gov/Genbank/index.html Тема 1.3. Физические основы конформационной стабильности биомолекул в различных условиях</p>			6					
<p>3. - самостоятельное изучение теоретического материала с использованием рекомендуемой литературы - написание реферата и его презентация; - подготовка к экзамену.</p>						14		
2. Макромолекулярные взаимодействия и динамические свойства								
<p>1. Тема 2.1. Термодинамика и кинетика процессов, лежащих в основе функционирования Тема 2.2. Макромолекулярные взаимодействия Конформационные переходы в белках и нуклеиновых кислотах Тема 2.3. Белок-белковые взаимодействия Тема 2.4. Биофизические аспекты взаимодействия белок-лиганд Тема 2.5. Физические свойства биомолекул в растворе. Роль молекул воды и сольватация биомолекул Тема 2.6 Фолдинг макромолекул Тема 2.7. Каталитическая активность биологических макромолекул. Молекулярные моторы</p>	7							

<p>2. Тема 2.1. Макромолекулярные взаимодействия Тема 2.2. Конформационные переходы в белках и нуклеиновых кислотах Тема 2.3. Белок-белковые взаимодействия Тема 2.4. Биофизические аспекты взаимодействия белок-лиганд Тема 2.5. Физические свойства биомакромолекул в растворе. Роль молекул воды и сольватация биомолекул Тема 2.6. Фолдинг макромолекул Тема 2.7. Каталитическая активность биологических макромолекул Тема 2.8. Молекулярные моторы</p>			6					
<p>3. - самостоятельное изучение теоретического материала с использованием рекомендуемой литературы - написание реферата и его презентация; - подготовка к экзамену.</p>							18	
3. Биофизические методы молекулярной биологии								
<p>1. Тема 3.1. Современные биофизические методы изучения структурно-динамической организации биологических макромолекул Тема 3.2. Биофизические методы исследования структуры и функций биологических макромолекул Тема 3.3. Методы компьютерного моделирования биологических макромолекул. Базы данных и компьютерная графика</p>	4							

2. Тема 3.1. Методы компьютерного моделирования биологических макромолекул. Базы данных и компьютерная графика. Освоение методов молекулярного моделирования с помощью программ Swiss-PdbViewer (http://www.expasy.ch/spdbv/), HyperChem, RosMol и др.			2					
3. - самостоятельное изучение теоретического материала с использованием рекомендуемой литературы - написание реферата и его презентация; - подготовка к экзамену.							12	
Всего	14		14				44	

4 Учебно-методическое обеспечение дисциплины

4.1 Печатные и электронные издания:

1. Волькенштейн М. В. Молекулярная биофизика: монография(Москва: Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит.).
2. Блюменфельд Л. А. Решаемые и нерешаемые проблемы биологической физики: [монография](Москва: Едиториал УРСС).
3. Хельтге Х.-Д., Зиппль В., Роньян Д., Фолькерс Г. Молекулярное моделирование. Теория и практика: пер. с англ.(Москва: БИНОМ, Лаборатория знаний).
4. Шульц Г. Е., Ширмер Р. Х., Попов Е. М. Принципы структурной организации белков: перевод с английского(Москва: Мир).
5. Волькенштейн М. В. Биофизика: учеб. пособие(СПб.: Лань).

4.2 Лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение, в том числе отечественного производства (программное обеспечение, на которое университет имеет лицензию, а также свободно распространяемое программное обеспечение):

1. Работа осуществляется при помощи широкого спектра лицензионных программных продуктов, закупленных по программе развития СФУ: Microsoft Office, Adobe Acrobat и др., а также современных информационных технологий (электронные базы данных, Internet)

4.3 Интернет-ресурсы, включая профессиональные базы данных и информационные справочные системы:

1. В рамках изучения дисциплины обучающимся обеспечен доступ к современным профессиональным базам данных, информационным справочным и поисковым системам:
2. – свободный доступ в сеть Интернет, в т. ч. к электронным реферативным базам данных, включающих научные журналы, патенты, материалы научных конференций, информацию по цитируемости статей, в том числе и для российских авторов (Издательство «Лань», Научная электронная библиотека (eLIBRARY.RU));
3. – доступ к Freedom Collection издательства Elsevier, в которую входят электронные научные полнотекстовые журналы по всем областям науки, техники, медицины. Охват более 15000 названий журналов.
4. В рамках освоения дисциплины используется одна из крупнейших информационных систем в области биологии медицины, биофизики Национального центра биотехнологической информации (National Center for Biotechnology Information (NCBI)), США (www.NCBI.nlm.nih.gov).
5. БД NCBI являются достаточно сложным инструментарием с разнообразным функционалом. Ниже приведено краткое описание основных БД NCBI, которые могут быть полезны при прохождении практики и подготовке отчета.

6. БД Nucleotide (<http://www.NCBI.nlm.nih.gov/sites/Entrez?db=nucleotide>) объединяет данные последовательностей нуклеиновых кислот из нескольких исходных БД, в том числе GenBank, RefSeq и др. Данные могут быть найдены по регистрационному номеру, имени автора, наименованию организма, генома/белка, а также ряду других параметров.
7. БД Protein (<http://www.NCBI.nlm.nih.gov/sites/Entrez?db=protein>) является коллекцией аминокислотных последовательностей из нескольких источников, в том числе из GenBank, RefSeq и ТРА, а также SwissProt, PIR, PRF и PDB.
8. БД Structure (<http://www.NCBI.nlm.nih.gov/Structure/index.shtml>) организуют доступ к результатам молекулярного моделирования макромолекул и связанным с ними БД: трехмерных биомолекулярных структур полученных с помощью рентгеновской кристаллографии и ЯМР-спектроскопии; БД химических структур небольших органических молекул; к информации об их биологической активности и т. д.
9. БД Gene (<http://www.NCBI.nlm.nih.gov/sites/Entrez?db=gene>) представляет собой инструмент для просмотра данных из широкого спектра геномов. Каждая запись – это один из генов определенного организма. Минимальный набор данных в гене запись включает уникальный идентификатор, т. н. Gene-ID.
10. БД dbMHC (<http://www.NCBI.nlm.nih.gov/gv/mhc/main.cgi?cmd=init>) предоставляет открытую платформу, где научное сообщество может размещать, просматривать и редактировать данные Major Histocompatibility Complex (МНС) для человека. БД dbMHC полностью интегрирована с другими ресурсами NCBI, а также с Международной рабочей группой гистосовместимости (IHWG).
11. DbSNP (<http://www.NCBI.nlm.nih.gov/SNP/>) – БД одиночных нуклеотидных полиморфизмов, полиморфных повторяющихся элементов, включающая как гибридные данные, так и полученные только экспериментальным путем.
12. БД Reference Sequence (RefSeq) (<http://www.NCBI.nlm.nih.gov/RefSeq/>), содержащая последовательности, в том числе геномных ДНК, белков и т. д., является основой для проведения функциональных исследований, геномной идентификации, сравнительного анализа и т. п. В частности, релиз от 11.07.2012 включал в себя описания 16 393 342 белков и 17 605 организмов.
13. БД Genomic Biology представляет собой объединение нескольких ресурсов и инструментов геномной биологии, в том числе геномных карт для Fruit fly, Human, Malaria parasite, Mouse, Rat, Retroviruses, Zebra fish и т. д., которые дополнительно содержат ссылки на интернет-ресурсы и БД, касающиеся рассматриваемых видов.

14. В БД UniGene (<http://www.NCBI.nlm.nih.gov/unigene/>) полноразмерные mRNA последовательности организованы в уникальные кластеры, представляющие известные или предполагаемые гены. Для кластеров доступна информация по картированию, экспрессии и другие ресурсы.
15. HomoloGene (<http://www.NCBI.nlm.nih.gov/homologene>) – инструмент для автоматизированного выявления гомологов среди аннотированных генов, который сравнивает нуклеотидные последовательности между парами организмов в целях выявления предполагаемых ортологов.
16. GenBank (<http://www.NCBI.nlm.nih.gov/genbank/index.html>) – БД, содержащая доступные последовательности нуклеотидов для более чем 260 000 организмов, вся информация в генетическом банке данных сопровождается библиографическими ссылками и биологическими аннотациями. GenBank автоматически интегрирует информацию о геноме и БД белковых последовательностей для изучения, учитывая таксономию, геном, белковую структуру и другую информацию.
17. Объединяющим фактором и при этом крайне удобным инструментом поиска в NCBI является поисковая система Search NCBI databases (<http://www.NCBI.nlm.nih.gov/sites/gquery>). Она обеспечивает одновременный доступ как к нуклеотидным и белковым последовательностям (GenBank, EMBL, DDBJ, PIR-International, PRF, Swiss-Prot и PDB, GenPept, RPF), 3-мерным структурам и популяционным данным, так и к библиографическим БД (PubMed, PubMed Central и т. д.). Доступ к поисковой системе Search NCBI databases может быть легко получен с помощью прямого интернет-адреса (<http://www.NCBI.nlm.nih.gov/gquery/>) либо посредством использования стартовой страницы NCBI (<http://www.NCBI.nlm.nih.gov/>). На этой странице приведен полный перечень инструментария и БД NCBI и существует возможность получить доступ к любой из перечисленных БД.

5 Фонд оценочных средств

Оценочные средства находятся в приложении к рабочим программам дисциплин.

6 Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Необходимое для реализации дисциплины «Молекулярное моделирование» материально-техническое обеспечение включает в себя:

учебные аудитории, оборудованные аппаратно-программными комплексами «Малый презентационный комплекс», «Доска обратной проекции», «Средний презентационный комплекс;

компьютерный класс, укомплектованные современными компьютерами, классы на 15 рабочих мест с выходом в Интернет.